

# 量子化学

井田 隆

名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター

## 0. はじめに

### Introduction

量子化学の教科書は、「普通でない」記述のされ方が用いられていることが多く、そのために理解が困難になる面があると思われる。

この一連の PDF では、普通の記述のしかたを採用して、量子化学の初等的な部分について説明することを試みた。また、式の導出については、意図的にややうるさいくらいまで詳しく記述した。

量子化学の教科書の「普通でない」ところとして、例えば、以下のようなことがある。

- (i) 電荷の単位として静電単位が用いられることが多い。静電単位を使うと真空の誘電率を 1 とおけるので少しだけ式が簡単になるが、利点はそれほど大きくなく、現実的な問題を扱う場合に混乱を招きやすい。化学の分野はどちらかというとも SI 単位を使うことが強く推奨されているのに、量子化学だけが別というのは納得しがたい。
- (ii) 調和振動子の波動関数を表すためのエルミート多項式 Hermite polynomial として、どちらかというとも標準的ではない定義が用いられる。インターネットなどで検索すると、標準的な定義によるエルミート多項式の情報容易に得られるが、これと食い違っているので混乱してしまう。
- (ii) 水素類似原子の動径波動関数を表すためのラゲールの陪多項式 associated Laguerre polynomial として、あまり普通でない定義が用いられる。インターネットなどで検索して得られる情報と食い違っているので混乱してしまう。

以下の内容を含む

#### 1. シュレーディンガー方程式 Schrödinger equation

#### 2. 井戸型ポテンシャル square well potential

##### 2-1 一次元井戸型ポテンシャル one-dimensional square well potential

##### 2-2 直方体型井戸型ポテンシャル rectangular square well potential

##### 2-3 球形井戸型ポテンシャル spherical square well potential

3. 調和振動子 harmonic oscillator

4. 水素類似原子 hydrogen-like atom

4-1 ハミルトニアン Hamiltonian

4-2 変数分離 separation of variables

4-3 球面調和関数 spherical harmonic function

4-4 動径波動関数 radial wave function